

01;02

Электростатические ионные ловушки с разделением переменных в параболических координатах

© Ю.К. Голиков, К.В. Соловьев

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
E-mail: k-solovyev@mail.ru

Поступило в Редакцию 25 ноября 2009 г.

Рассмотрены электростатические ловушки с идеальной пространственно-временной фокусировкой по одному из направлений движения ионов и интегрируемым по методу Гамильтона–Якоби движением в поперечных направлениях. Определены условия удержания ионов в поле ловушки. Численным интегрированием уравнений Лагранжа проведена независимая проверка финитности движения ионов в поле при выполнении условий их удержания.

Электростатические ионные ловушки с идеальной пространственно-временной фокусировкой впервые описаны в работе [1]. Безразмерный электростатический потенциал в них имеет вид ([2])

$$\varphi(x, y, z) = z^2 + f(x, y), \quad f_{xx} + f_{yy} + 2 = 0. \quad (1)$$

Благодаря аддитивному члену z^2 в потенциале движение вдоль z отделено и описывается формулой гармонических колебаний

$$z = z_0 \cos(\sqrt{2}\tau) + \frac{\dot{z}_0}{\sqrt{2}} \sin(\sqrt{2}\tau). \quad (2)$$

Безразмерное время τ и реальное время t связаны соотношением ([2]):

$$t = T\tau, \quad T = l \sqrt{\frac{m}{|q\Phi_0|}}, \quad (3)$$

где m , q — масса и заряд иона, l — характерный габарит электростатической системы, Φ_0 — ее характерный потенциал. Поперечное движение в плоскости x , y определяется свойствами функции $f(x, y)$.

Движение по z , согласно (1), всегда финитно. Из соотношения (2) видно, что при $z_0 = \text{const}$ в моменты времени

$$\tau_n = \pi n / \sqrt{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

ионы имеют координату

$$z_n = (-1)^n z_0, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

независимо от величины начальной скорости \dot{z}_0 , и в этом состоит смысл идеальной пространственно-временной фокусировки. Динамика ионного листа в поперечной плоскости может быть произвольной, но для ловушки должна быть финитной. Физические моменты идеальной фокусировки даются выражением

$$t_n = n \frac{\pi}{\sqrt{2}} l \sqrt{\frac{m}{|q\Phi_0|}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

Таким образом, плоские ионные пакеты периодически идеально сгущаются, но с периодом, зависящим от массы m . Благодаря этому эффекту ионы разных масс можно детектировать по времяпролетному принципу, но можно различать их и по частоте колебаний пакета по z . Последний способ детектирования был, в частности, реализован в работе [3]. Другой вариант идеальной фокусировки связан с тем, что при $\dot{z}_0 = 0$ и вариации z_0 „брус“ ионов $z_1 < z < z_2$ в моменты

$$\tau_n = (\pi/2 + \pi n) / \sqrt{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7)$$

также сжимается в плоскость $z_n = 0$, что тоже используется для целей масс-анализа ([4]).

Главная задача синтеза ионной ловушки заключается в подборе функций $f(x, y)$, обеспечивающих финитность движения в плоскости x, y . В нашей работе [2] найдены все типы $f(x, y)$, допускающих полное разделение переменных в уравнении Гамильтона–Якоби. Эти структуры, как оказалось, способны обеспечивать устойчивое финитное движение в плоскости x, y . В данной статье рассматривается один из вариантов такой ловушки, движение в которой интегрируется в конформных параболических координатах u, v , вводимых соотношениями

$$\xi = \omega^2, \quad \zeta = x + iy, \quad \omega = u + iv. \quad (8)$$

Полный потенциал, соответствующий случаю разделения, имеет в декартовых координатах вид

$$\varphi(x, y, z) = z^2 - \frac{4}{5}x^2 - \frac{1}{5}y^2 + \mu x + \operatorname{Re} \frac{\varepsilon + i\delta}{\sqrt{x + iy}}, \quad (9)$$

где Re — реальная часть комплексной величины, μ , ε и δ — вещественные константы. В параболических координатах u , v потенциал (9) запишется следующим образом:

$$\varphi(u, v, z) = z^2 - \frac{4}{5}(u^2 - v^2)^2 - \frac{4}{5}(uv)^2 + \mu(u^2 - v^2) + \frac{\varepsilon u + \delta v}{u^2 + v^2}. \quad (10)$$

Разделение переменных в уравнении Гамильтона–Якоби в данном случае дает для поперечного движения (т. е. движения по координатам u , v) следующие соотношения:

$$\frac{p_u^2}{2} + U(u) = C, \quad \frac{p_v^2}{2} + V(v) = -C, \quad (11)$$

где p_u , p_v — u , v -импульсы, а $U(u)$, $V(v)$ — соответствующие эффективные потенциалы

$$U(u) = -\frac{16}{5}u^6 + 4\mu u^4 - 4gu^2 + \varepsilon u, \quad (12)$$

$$V(v) = -\frac{16}{5}v^6 - 4\mu v^4 - 4gv^2 + \delta v.$$

Величины C , g в (11), (12) — константы разделения переменных в уравнении Гамильтона–Якоби. В силу (11) вопрос о финитности поперечного движения по x , y (по u , v) сводится к вопросу о наличии потенциальных ям, формируемых функциями (12), и возможности одновременного нахождения в последних ионах с учетом того, что константа C входит в равенства (11) с противоположными знаками.

Проанализируем функции $U(u)$, $V(v)$. Чтобы избежать исследования полиномов шестой степени общего вида, введем функции $U_0(u) = U(u)|_{\varepsilon=0}$, $V_0(v) = V(v)|_{\delta=0}$:

$$U_0(u) = -\frac{16}{5}u^6 + 4\mu u^4 - 4gu^2, \quad V_0(v) = -\frac{16}{5}v^6 - 4\mu v^4 - 4gv^2. \quad (13)$$

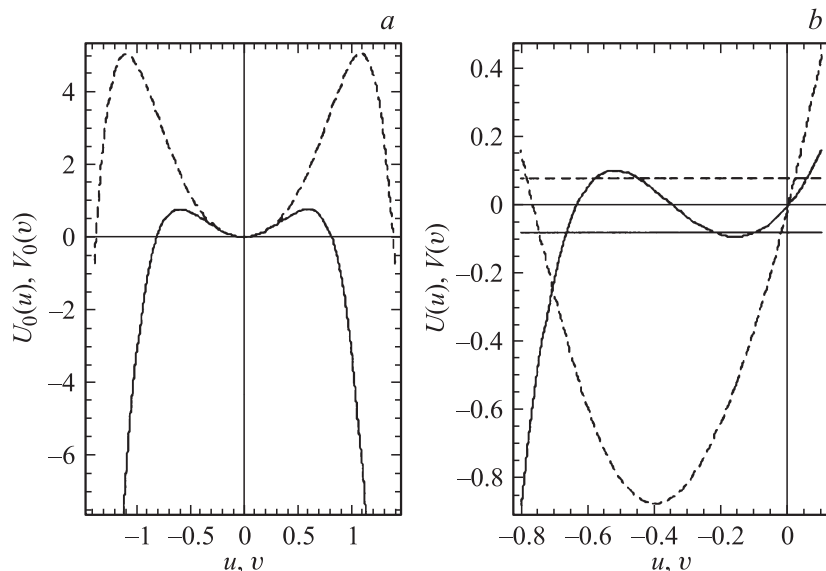


Рис. 1. Вид функций $U(u)$ (пунктир) и $V(v)$ (сплошная). Горизонтальные прямые (b, c) — функции $U = C$ (пунктир) и $V = -C$ (сплошная). Равенства $U(u) = C, V(v) = -C$ определяют границы области финитного движения. $\mu = 1, g = -1$. *a* — $\varepsilon = 0, \delta = 0$; *b* — $\varepsilon = 1, \delta = 0, C = -0.7$; *c* — $\varepsilon = 1, \delta = 0.3, C = 0.08$.

Полиномы (12) в этом случае можно рассматривать как возмущения (13) линейными функциями εu и δv , при малых значениях коэффициентов не сильно искажающие форму (12). Поскольку функции (13) отличаются друг от друга лишь знаком второго слагаемого, можно ограничиться исследованием лишь одной из них для случаев $\mu > 0$ и $\mu < 0$. Итак, ищем соотношения констант, обеспечивающих наличие потенциальных ям одновременно для u и v . Четность функций обеспечивает их симметрию по u и v соответственно, а отрицательность коэффициентов при старших степенях — стремление функций к минус бесконечности при $u, v \rightarrow \pm\infty$. Соответственно полиномы (13) обязаны иметь по крайней мере три экстремума, например, два максимума и один минимум между ними.

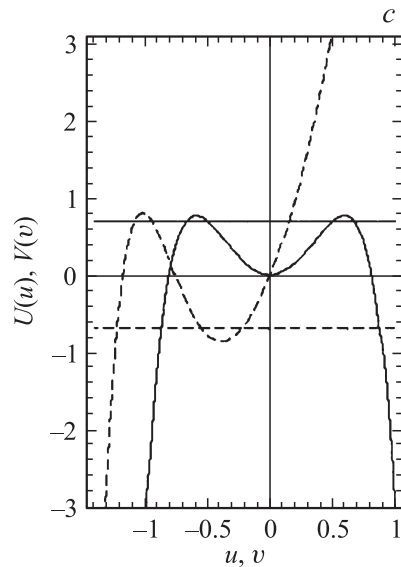


Рис. 1 (продолжение).

Условия $U'_0(u) = 0$, $V'_0(v) = 0$ приводят к равенствам

$$u = 0, \quad u^2 = \frac{5}{12}\mu \pm \sqrt{\left(\frac{5}{12}\mu\right)^2 - \frac{5}{12}g},$$

$$v = 0, \quad v^2 = -\frac{5}{12}\mu \pm \sqrt{\left(\frac{5}{12}\mu\right)^2 - \frac{5}{12}g}. \quad (14)$$

Очевидно, по три вещественных корня уравнения $U'_0(u) = 0$, $V'_0(v) = 0$ имеют при выполнении условий

$$\left(\frac{5}{12}\mu\right)^2 - \frac{5}{12}g > 0, \quad \left(\frac{5}{12}\mu\right)^2 - \frac{5}{12}g > \left(\frac{5}{12}\mu\right)^2. \quad (15)$$

Неравенства (15) справедливы для любого μ при отрицательных g . Расположенные в точках $u = 0$, $v = 0$ минимумы функций U_0 , V_0 имеют нулевое значение (рис. 1, а). Поскольку в (11) константа C входит с

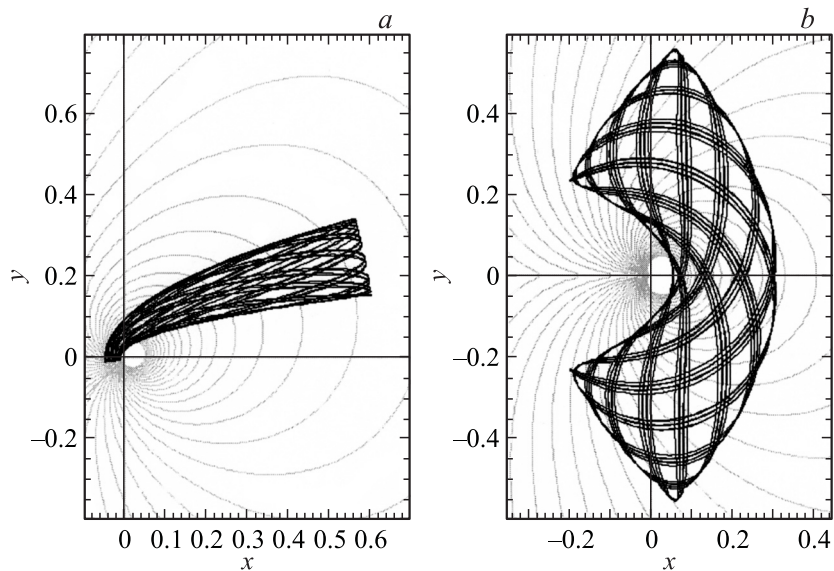


Рис. 2. Траектории ионов в проекции на плоскость x, y . Показаны также сечения эквипотенциальных поверхностей поля плоскостью $z = 0$. $\mu = 1, g = -1$. $a - \varepsilon = 1, \delta = 0, C = -0.7$; $b - \varepsilon = 1, \delta = 0.3, C = 0.08$.

противоположными знаками, по крайней мере одна из постоянных ε, δ должна быть отлична от нуля для обеспечения отрицательных значений $U(u)$ либо $V(v)$ в области финитности движения.

Уравнения движения ионов в ловушке в параболических координатах имеют вид

$$\begin{aligned}
 & (u^2 + v^2)\ddot{u} + (\dot{u}^2 - v^2)u + 2v\dot{u}\dot{v} \\
 & = \frac{2}{5}(2u^2 - v^2)u - \frac{\mu u}{2} + \frac{\varepsilon(u^2 - v^2) + 2\delta uv}{4(u^2 + v^2)^2}, \\
 & (u^2 + v^2)\ddot{v} + 2u\dot{v}\dot{u} + (v^2 - u^2)v \\
 & = \frac{2}{5}(2v^2 - u^2)v + \frac{\mu v}{2} + \frac{2\varepsilon uv + \delta(v^2 - u^2)}{4(u^2 + v^2)^2}. \quad (16)
 \end{aligned}$$

Для случая финитного движения координаты точки старта (u_0, v_0) должны удовлетворять неравенствам $C - U(u_0) > 0$, $-C - V(v_0) > 0$, а скорости — быть связаны с координатами и константами разделения переменных соотношениями

$$\dot{u}_0 = \frac{\sqrt{2(C - U(u_0))}}{4(u_0^2 + v_0^2)}, \quad \dot{v}_0 = \frac{\sqrt{2(-C - V(v_0))}}{4(u_0^2 + v_0^2)}. \quad (17)$$

Примеры полученных численным интегрированием системы (16) траекторий ионов в ловушке в проекции на плоскость x, y для случаев b и c потенциальных ям (рис. 1) приведены на рис. 2, a и b соответственно. Вид траекторий полностью подтверждает справедливость найденных ранее условий удержания ионов в поле (9).

Список литературы

- [1] Галль Л.Н., Голиков Ю.К., Александров М.Л. и др. // А.с. № 1247973 от 01.04.1986. Приоритет от 16.01.1985.
- [2] Голиков Ю.К., Краснова Н.К., Соловьев К.В. и др. // Прикладная физика. 2006. № 5. С. 50–57.
- [3] Hu Q., Noll R., Li H., Makarov A., Hardman M., Cooks G. // J. Mass Spectrom. 2005. V. 40. P. 430–443.
- [4] Golikov Yu.K., Krasnova N.K. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A. 1999. V. 427. P. 209–213.